Index

Commentationes et Relationes

Absar, I., Schaad, L. J., Wazer, J. R. Van: An *ab initio* LCAO-MO-SCF Study of the Electronic Structure of Phosphirane and Thiirane 173

Alagona, G., Cimiraglia, R., Lamanna, U.: Theoretical Investigations on the Solvation Process. III. STO Double-ζ SCF Calculations on the Hydrated Proton $H_5O_2^+$ 93

Amos, A. T., Burrows, B. L.: Dispersion Interactions and Solvent-Shift Effects 139

Becker, J. Y., Meyer, A. Y., Klein, J.: Sesquiacetylenes 313

Bendazzoli, G. L., Bernardi, F., Zauli, C., Palmieri, P.: Atomic Wave Functions by Rotational Projections of Floating Orbitals 85

Bernardi, F., s. Bendazzoli, G. L., *et al.* 85

Berthier, G. s. Meunier, A., *et al.* 49

Burnelle, L. A., s. Macaulay, R., *et al.* 1

Burrows, B. L., s. Amos, A. T. 139

Cimiraglia, R., s. Alagona, G., *et al.* 93

Csizmadia, I. G., s. Strausz, O. P., *et al.* 183

Condirston, D. A., Moule, D. C.: Barriers to Molecular Inversion in ($n\pi^*$) Carbonyls: A CNDO Investigation 133

Denis, A., Langlet, J., Malrieu, J. P.: Orbital and Excitonic Descriptions of Molecular Excited and Ionized States. I. Delocalization of the Excitation 117

Fischer-Hjalmars, I., Kowalewski, J.: Simplified Non-Empirical Excited States Calculations
Part II. Interpretation of the Electronic Transitions in the Vacuum-UV Spectrum of Ethylene 345

Francke, E., Moncuit, C.: Le spectre d'absorption électronique du trichloroamminoplatinate de potassium cristallisé 319

Frost, A. A., s. Nelson, J. L. 75

Gamba, A., Tantardini, G. F., Simonetta, M.: Transition Energies and Oscillator Strengths for Electronic Spectra of Non Planar Conjugated Molecules. I. Polyphenyls 335

Haase, D., Ruch, E.: Quantenmechanische Theorie der optischen Aktivität der Methanderivate im Transparenzgebiet 189

Haase, D., Ruch, E.: Bemerkung zur Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie 235

Haase, D., Ruch, E.: Quantenmechanische Theorie der optischen Aktivität der Allenderivate im Transparenzgebiet 247

Hässelbarth, W., s. Ruch, E. 259

Hopkinson, A. C., s. Strausz, O. P., *et al.* 183

Janoschek, R.: *Ab initio*-Behandlung der IR- und Ramanaktivität der Wasserstoffbrücke $(ClHCl)^-$ unter Berücksichtigung der Umgebung 57

Johansson, A., Kollman, P., Rothenberg, S.: An Application of the Functional Boys-Bernardi Counterpoise Method to Molecular Potential Surfaces 167

Jortner, J., s. Nitzan, A. 97

Jug, K.: Effects of Polarization on Charge Distributions and Integral Approximations . . 9

Kahn, O., Kettle, S. F. A.: Couplage vibronique et anisotropie paramagnétique dans un complexe cubique $^2T_2$ soumis à un champ trigonal 359

Karwowski, J.: Matrix Elements of One- and Two-Electron Operators 151
Kettle, S. F. A., s. Kahn, O. 359
Klein, J., s. Becker, J. Y., *et al.* 313
Kollman, P., s. Johansson, A., *et al.* 167
Kowalewski, J., s. Fischer-Hjalmars, I. 345
Lamanna, U., s. Alagona, G., *et al.* 93
Langlet, J., s. Denis, A., *et al* 117
Lévy, B., s. Meunier, A., *et al.* 49
Macaulay, R., Burnelle, L. A., Sandorfy, C.: Theoretical Investigation of the Carbon Nitrogen Double Bond 1
Malrieu, J. P., s. Denis, A., *et al.* 117
Mead, A., Ruch, E., Schönhofer, A.: Theory of Chirality Functions, Generalized for Molecules with Chiral Ligands 269
Meunier, A., Lévy, B., Berthier, G.: Corrélation électronique et effets de base dans l'étude de la liaison hydrogène: le dimère mixte ammoniac-eau 49
Meyer, A. Y., s. Becker, J. Y., *et al.* 313
Meyer, H., Schweig, A.: Molecular Dipole Polarizabilities Based on MINDO/1 and MINDO/2 Wavefunctions 375
Moncuit, C., s. Francke, E. 319
Moule, D. C., s. Condirston, D. A. 133
Nelson, J. L., Frost, A. A.: Local Orbitals for Bonding in Ethane 75
Niessen, W. von: Density Localization of Atomic and Molecular Orbitals. III. Heteronuclear Diatomic and Polyatomic Molecules 29
Nitzan, A., Jortner, J.: Electronic Relaxation of Small Molecules in a Dense Medium . . . 97
Norstrom, R. J., s. Strausz, O. P., *et al.* 183
Palmieri, P., s. Bendazzoli, G. L., *et al.* 85
Pancíř, J.: Study of Reaction Mechanisms by Semiempirical Methods. I. Optimization of the Geometry of the Molecule in the Framework of a Single Calculation of the Energy Function 21
Rothenberg, S., s. Johansson, A., *et al.* 167
Ruch, E., Hässelbarth, W.: Classifications of Rearrangement Mechanisms by Means of Double Cosets and Counting Formulas for the Numbers of Classes 259
Ruch, E., s. Haase, D. 189, 235, 247
Ruch, E., s. Mead, A., *et al.* 269
Sandorfy, C., s. Macaulay, R., *et al.* 1
Schaad, L. J., s. Absar, I., *et al.* 173
Schoenborn, M., s. Strausz, O. P., *et al.* 183
Schönhofer, A., s. Mead, A., *et al.* 269
Schweig, A., s. Meyer, H. 375
Simonetta, M., s. Gamba, A., *et al.* 335
Strausz, O. P., Norstrom, R. J., Hopkinson, A. C., Schoenborn, M., Csizmadia, I. G.: An *ab initio* Molecular Orbital Study of the C_2F_2 Species: The Difluorovinylidene → Difluoroacetylene Rearrangement 183
Sustmann, R., Vahrenholt, F.: Application of SCF-Perturbation Theory to Hydrogen Bonding in Water Dimers 305
Tantardini, G. F., s. Gamba, A., *et al.* 335
Vahrenholt, F., s. Sustmann, R. 305
Wazer, J. R. Van, s. Absar, I., *et al.* 173
Zauli, C., s. Bendazzoli, G. L., *et al.* 85

Indexed in Current Contents

Theoretica Chimica Acta

It is a fundamental condition that manuscripts submitted have not been, and will not be published elsewhere, either simultaneously or at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries. Unless special permission has been granted by the publishers, no photographic reproductions, microform or any other reproductions of a similar nature may be made of the journal, of individual contributions contained therein or of extracts therefrom.

The use of registered names, trademarks, etc. in this publication does not imply, even in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protective laws and regulations and therefore free for general use.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, seinen Beitrag auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung, auch in Mikroform, an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,40 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

En principe, ne sont acceptés que des articles n'ayant jamais été publiés, ni dans leur pays d'origine, ni à l'étranger. L'auteur s'engage à ne pas remettre son manuscrit ailleurs après acceptation. Dès l'acceptation d'un manuscrit et sa publication par la maison d'édition, le droit d'impression pour toutes langues et tous pays, y compris le droit de reproduction photographique, en microforme ou par tout autre moyen, est acquis par la maison d'édition.

L'utilisation de marques déposées, marques de commerce, etc., dans ce journal, même sans indications particulière, n'implique pas que l'emploi de ces dénominations est exonéré des restrictions qu'imposent les lois régissant l'utilisation des marques déposées, etc.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 29 Fasc. 4

Commentationes

Sustmann, R., Vahrenholt, F.: Application of SCF-Perturbation Theory to Hydrogen Bonding in Water Dimers 305

Becker, J. Y., Meyer, A. Y., Klein, J.: Sesquiacetylenes 313

Francke, E., Moncuit, C.: Le spectre d'absorption électronique du trichloroamminoplatinate de potassium cristallisé 319
Electronic Absorption Spectra of Crystallized K $[Pt\ Cl_3\ (NH_3)] \cdot H_2O$

Gamba, A., Tantardini, G. F., Simonetta, M.: Transition Energies and Oscillator Strengths for Electronic Spectra of Non Planar Conjugated Molecules. I. Polyphenyls 335

Fischer-Hjalmars, I., Kowalewski, J.: Simplified Non-Empirical Excited States Calculations
Part II. Interpretation of the Electronic Transitions in the Vacuum-UV Spectrum of Ethylene 345

Kahn, O., Kettle, S. F. A.: Couplage vibronique et anisotropie paramagnétique dans un complexe cubique $^2T_2$ soumis à un champ trigonal 359
Vibronic Coupling and Paramagnetic Anisotropy of a Cubic Complex $^2T_2$ Subjected to a Trigonal Field

Relatio

Meyer, H., Schweig, A.: Molecular Dipole Polarizabilities Based on MINDO/1 and MINDO/2 Wavefunctions 375

Indexed in Current Contents

Responsible for advertisements: L. Siegel, D-1000 Berlin 15, Kurfürstendamm 237
Telephone (0311) 8 83 01 31, Telex: 01-85 411

Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York

Printed in Germany by Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

© by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1973